

ИССЛЕДОВАНИЕ PG-5 В РАСТВОРЕ С МИЦЕЛЛАМИ МЕТОДАМИ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ

Колосова О.А., Усачев К.С., Клочков В.В.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

kolosova.olga11@gmail.com

Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР) высокого разрешения одна из наиболее информативных методик для определения пространственной структуры и динамики биомолекул в растворе. В данной работе с помощью спектроскопии ЯМР нами была определена структура протегрина 5 (PG-5). Протегрины, - антимикробные пептиды, эффективные против широкого спектра видов бактерий, грибов и оболочечных вирусов; они способны образовывать олигомеры, вызывающие лизис клеток путем образования трансмембранных пор. Для понимания молекулярного механизма действия таких пептидов, необходима информация о пространственном строении комплекса «пептид – модельная мембрана», а также о строении данных пептидов в растворе.

Целью данной работы являлось определение пространственной структуры PG-5 в растворе в комплексе с системами, имитирующими поверхность клеточной мембраны (мицеллы додецилфосфохолина,ДФХ) и нахождение общих закономерностей формирования трансмембранных пор.

На основе экспериментальных данных двумерных гомо- и гетероядерных экспериментов ЯМР и теоретического моделирования молекулярной структуры впервые были определены конформации и геометрические параметры протегрина PG-5 (PDB ID: 2NC7). Было установлено, что исследуемый пептид в растворе с мицеллами ДФХ образует β -складку, показана возможность механизма димеризации протегринов и наличие механизма дальнейшей ассоциации димеров в олигомеры, а также предположена модель о поэтапном образовании трансмембранной поры.

Материалы доклада опубликованы в Bionanoscience Topic Issue "Translational Medicine- Kolosova O.A., Usachev K.S., Aganov A.V., Klochkov V.V. (2016) Antimicrobial Peptide Protegrins Interact with DPC Micelles by Apolar Hydrophobic Cluster: Structural Studies by High-Resolution NMR Spectroscopy. BioNanoScience, DOI 10.1007/s12668-016-0218-9